

Title	13族元素含有有機金属錯体の特異な光学特性の機構説明
Author(s)	伊藤, 峻一郎
Citation	京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステム研究成果報告書 (2018), 2017: 43-43
Issue Date	2018-03
URL	http://hdl.handle.net/2433/230743
Right	
Type	Article
Textversion	publisher

13 族元素含有有機金属錯体の特異な光学特性の機構解明

Investigation of optical properties of organometallic complexes containing group 13 elements

京都大学大学院 工学研究科 高分子化学専攻 重合化学分野 伊藤 峻一郎

研究成果概要

固体発光性分子は、有機ELや化学センサーなどへの応用が期待され、広く研究されている。当研究室ではこれまで Figure 1 に示す 13 族元素ジイミン錯体およびその共役系高分子を合成してきた¹⁻³。これらの分子が、溶液状態よりも固体状態でより強い発光を示すという凝集誘起型発光(AIE)

特性や、結晶化によりその発光強度が増大するという結晶化誘起型発光(CIE)特性を示すことを報告してきた。今回、そのような錯体の発光特性について、密度汎関数法(DFT)計算によって解析した。

各種アルミニウム錯体に関して、Gaussian 16 を用いて、DFT 並びに時間依存(TD-)DFT 計算を行った。計算レベルは、長距離相互作用を考慮した(TD-)CAM-B3LYP を用いた。まず、基底関数として 6-31+G(d,p)をもちいて基底状態の構造最適化並びに振動計算を実行し、次いで基底関数を 6-311+G(d,p)に変更し、 S_0-S_1 電子遷移を計算した。続いて励起状態についても同様に構造最適化および振動計算、電子遷移計算を行った。その結果、アルミニウム上の配位子の違いによって、励起状態における分子の構造緩和過程が全く異なることが示唆された。現在、計算結果を詳細に解析し、固体発光分子の分子設計について検討している。

また、各種ホウ素錯体およびその多量体についても同様の DFT 計算を行い、それらの光学特性の評価について検討を進めている。

発表論文(謝辞あり)

現在論文執筆中

発表論文(謝辞なし)

[1] Yoshii, R.; Hirose, A.; Tanaka, K.; Chujo, Y. *J. Am. Chem. Soc.* **2014**, *136*, 18131–18139.

[2] Ito, S.; Hirose, A.; Yamaguchi, M.; Tanaka, K.; Chujo, Y. *J. Mater. Chem. C* **2016**, *4*, 5564–5571.

[3] Ito, S.; Hirose, A.; Yamaguchi, M.; Tanaka, K.; Chujo, Y. *Polymers* **2017**, *9*, 68–78.

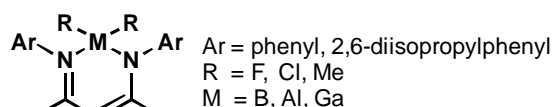


Figure 1. Chemical structures of group 13 diimine complexes.